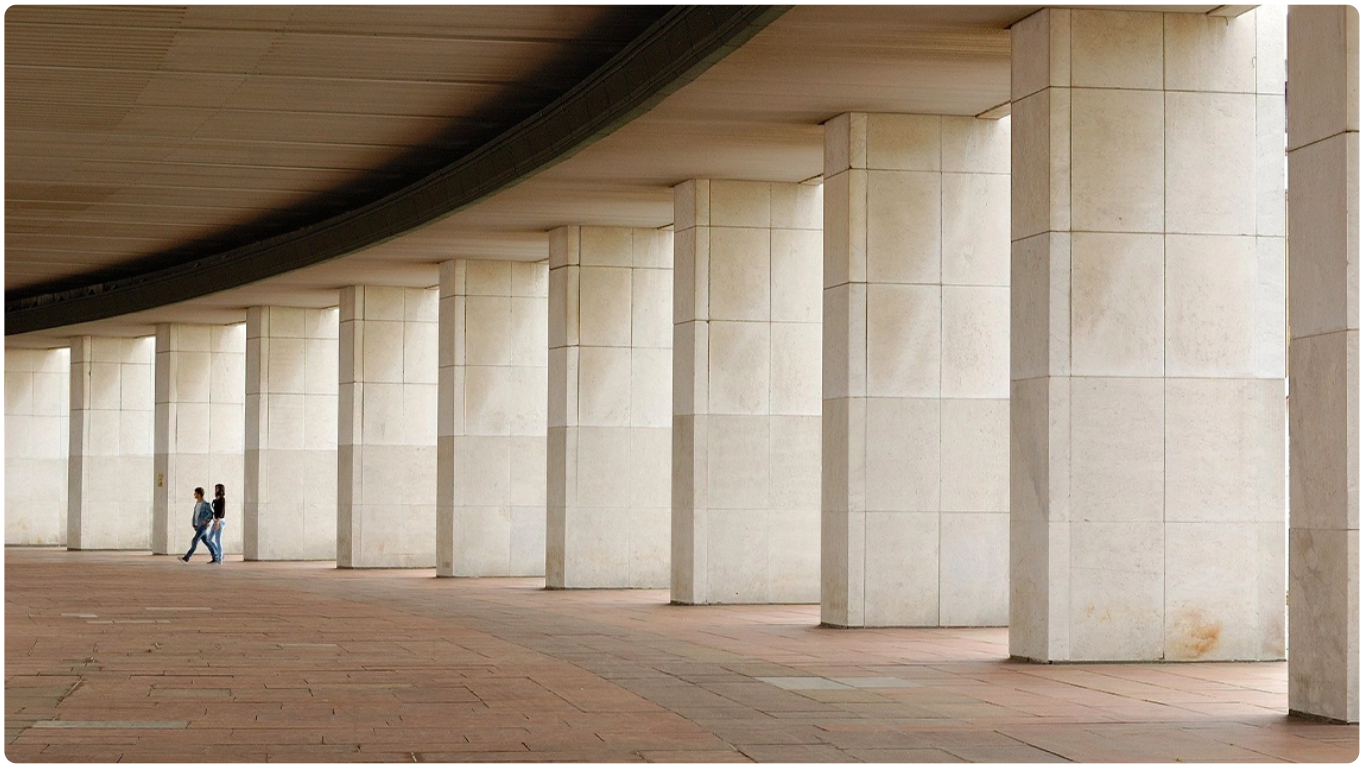
16 | 性能评估：不平衡数据集应该使用何种评估指标？

2021-10-04 黄佳

《零基础实战机器学习》 课程介绍 >



讲述：黄佳

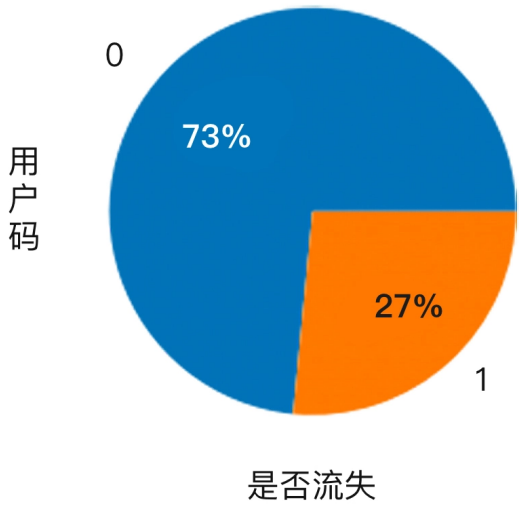
时长 25:36 大小 23.46M

你好，我是黄佳。欢迎来到零基础实战机器学习。

上一讲中，我们通过逻辑回归和深度学习神经网络两种模型，判断了会员流失的可能性，准确率大概在 78% 左右。我想考一考你，这个准确率是否能够反映出模型的分类性能？

也许你会回答，看起来没什么问题啊。但是，如果我告诉你，对于这个数据集来说，即使不用任何机器学习模型，我闭着眼睛也能够达到 70% 以上的预测准确率。你会不会吓一跳，说，这怎么可能呢？

其实，如果你仔细观察一下这个数据集已经流失和留存下来的会员比例，就会发现，在这个数据集中，留下的会员是 73%，而已经离开的会员占 27%。



流失与否？

这也就是说，如果我直接提出一个模型，**判断所有的会员都会留存，那我这个模型的预测准确率就是 73%**。所以说，要达到 70% 以上的预测准确率，真的是没有什么难度。

我再举一个极端一点的例子，在银行客户欺诈行为的检测系统中，存在欺诈行为的客户可能不到万分之一。那么，一个模型只要预测所有的客户都没有欺诈行为，这个模型的准确率就能达 99.999%。

然而，这样的模型没有任何意义。因为**我们的目标不是判断出这 9999 个正常客户，而是要想法设法找出那万分之一的异常客户。**所以，对于我们这个问题来说，如何精确定位那 23% 的可能流失的客户，才是关键所在。

因此，**评估分类模型要比评估回归模型的难度大很多，评估的方法也更为多样化，尤其是对于各类别中样本数量并不平衡的数据集来说，我们绝对不能单用准确率这一个方面作为考量的标准。**

那么，什么指标才更合适呢？这里，我给你介绍四个重要的分类评估方法。这四个分类评估方法和分类准确率一样，可以广泛适用于几乎所有的分类问题，尤其是对于样本类别不平衡的问题来说，这些方法比准确率更为客观。

混淆矩阵

在认识第一种评估方法“混淆矩阵”（Confusion Matrix）之前，我们先来看一个例子。假设“易速鲜花”一共有 100 个会员（举个例子而已），其中 73 个留存了下来，27 个流失了。那么，我们就可以这样表示这个数据集的真值：

	留（标签0）	失（标签1）
数据集真值	73	27

如果这时候有一个模型 A，它的预测结果是 77 个留存，23 个流失。那么，上面这张表就会变成这样：

	留（标签0）	失（标签1）
数据集真值	73	27
预测结果	77	23

要想知道这个模型 A 预测得准不准，我们就要看一下在这 77 个留存用户和 23 个流失用户中，有多少是预测正确的，多少是错误的。但是，在现有的表格中，我们并不能了解到。所以现在，我们不妨引入这样一个矩阵：

		预测值	
		0	1
真值	0	70 真负TN	3 假正FP
	1	7 假负FN	20 真正TP

这是一个由预测值和真值共同组成的矩阵，四个象限从上到下，从左到右分别为：

真负：真值为负、预测为负，即 True Negative，缩写为 TN；

假正：真值为负，预测为正，即 False Positive，缩写为 FP；

假负：真值为正，预测为负，即 False Negative，缩写为 FN；

真正：真值为正，预测为正，即 True Positive，缩写为 TP。

这个矩阵就是混淆矩阵，这里的“真”“假”就代表实际值（真值）和预测值一致与否；而“正”“负”就代表预测出来的值是 1 还是 0。所以，对于“预测用户是留存还是流失”这个问题来说：

真负 (TN)，代表被模型判断为留存的留存用户数：70；

假正 (FP)，代表被模型判断为流失的留存用户数：3；

假负 (FN)，代表被模型判断为留存的流失用户数： 7；

真正 (TP)，代表被模型判断为流失的流失用户数： 20。

这样矩阵就能反应出模型预测的真实情况了。对于模型 A 来说，在 73 个留存用户中，它预测对了 70 个；在 27 个流失用户中，它预测对了 20 个。所以，它整体的准确率就是：

模型A的整体准确率 $= \frac{70+20}{100} = 90\%$

当然，对于我们上一讲的项目来说，**在这个矩阵中，我们最看重的应该是“真正”这个象限的数字，因为它代表了模型找出了多少个即将流失的用户。只有这个数字，才能对“易速鲜花”的运营状况产生正面促进。**

这时候，如果还有另一个模型 B，它的预测结果和模型 A 的一样，也是 77 个留存用户，23 个流失用户，那我想，你应该不会轻易认为模型 B 的准确率和模型 A 的一样了，因为它的混淆矩阵很可能是这样的：

		预测值	
		0	1
真值	0	55 真负TN	18 假正FP
	1	22 假负FN	5 真正TP

在 75 个留存用户中，模型 B 预测准了 55 个，还算勉强可以。但是对于 23 个流失客户来说，模型 B 只预测出 5 个。所以，这个模型 B 预测的整体准确率为：

$$模型B的整体准确率 = \frac{55+5}{100} = 60\%$$

由于我们真正的目的是找到流失客户，从这个目的来讲，模型 B 的准确率还不到 20% 呢。

到这里，我想你应该感受到混淆矩阵的威力了。那对于上一讲里“预测哪些客户流失风险比较高”这个项目，我们就可以借助混淆矩阵，来评估三个模型（逻辑回归模型、未做归一化的 DNN 神经网络，以及归一化之后的 DNN 神经网络）的优劣了。

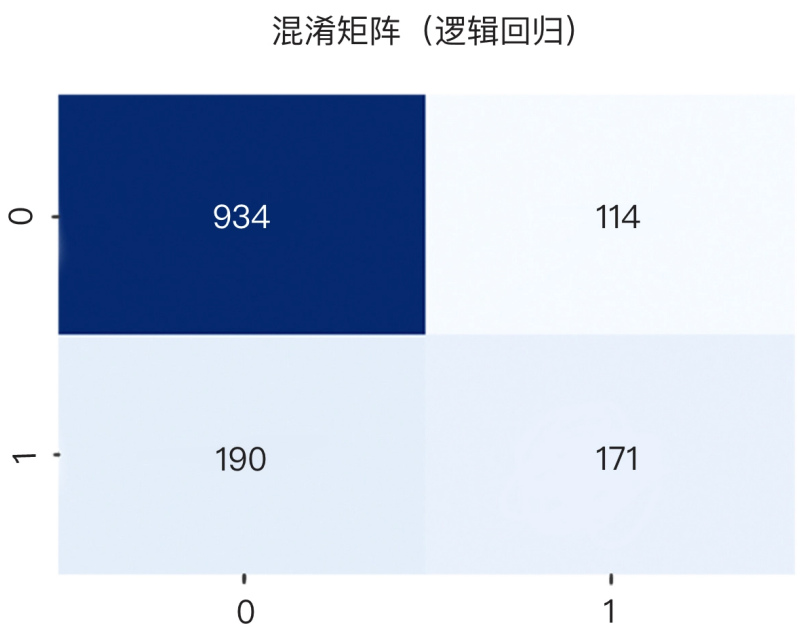
要计算这三个模型的混淆矩阵，我们可以用 sklearn 中的 confusion_matrix 工具。不过，我们还需要定义一个用来显示混淆矩阵的函数，我把它命名为 show_matrix（这里我们不重复数据导入和预处理以及模型训练的代码），完整代码请在这里下载：

```
from sklearn.metrics import confusion_matrix # 导入混淆矩阵
import seaborn as sns #导入seaborn画图工具箱
def show_matrix(y_test, y_pred): # 定义一个函数显示混淆矩阵
    cm = confusion_matrix(y_test,y_pred) # 调用混淆矩阵
    plt.title("混淆矩阵") # 标题
    sns.heatmap(cm,annot=True,cmap="Blues",fmt="d",cbar=False) # 热力图
    plt.show() # 显示混淆矩阵
```

然后，我们调用 show_matrix 函数，先来显示逻辑回归模型的混淆矩阵：

```
show_matrix(y_test, y_pred) # 逻辑回归
```

输出如下：



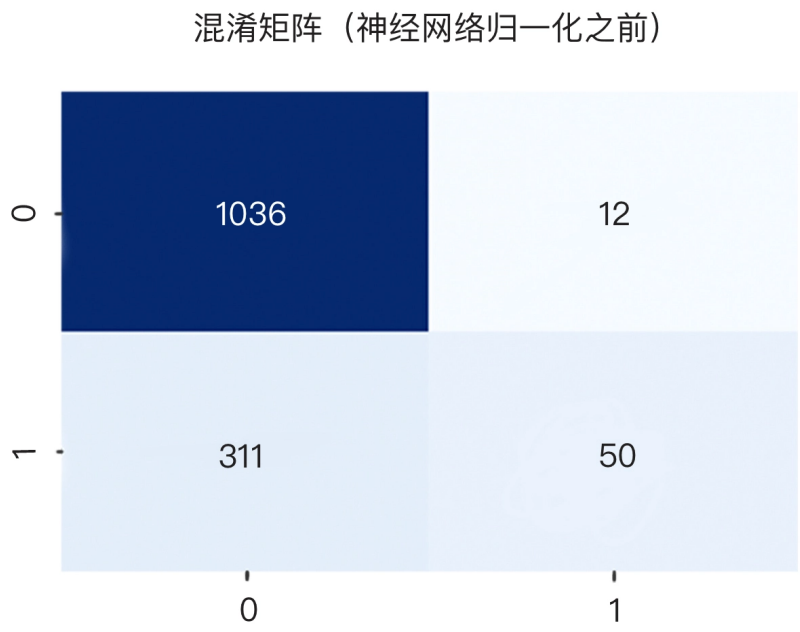
接着，我们再显示 DNN 神经网络做归一化之前和归一化之后的混淆矩阵。注意，**我这样做目的，是为了向你展示，两个分类准确率看起来近似的模型，它们的混淆矩阵内容可能会很不一样哦！**

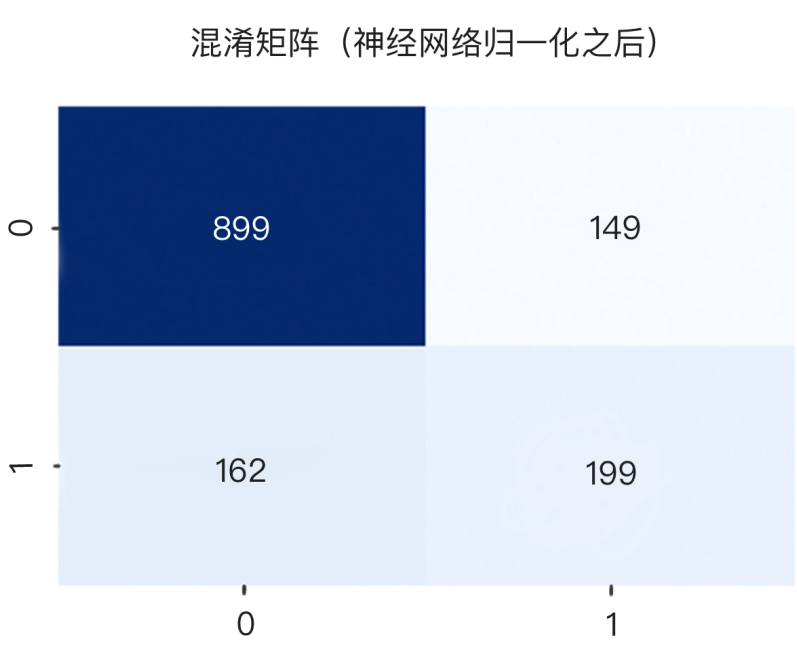
此外，我还要说明一点，我们在这一讲中跑出来的预测结果，很可能和上一讲中的预测结果不完全一致。因为神经网络每次训练时是随机拆分数据集的，而且梯度下降的随机性和局部最低点也将导致每次的模型结果会有所不同。

复制代码

```
y_pred = ann.predict(X_test,batch_size=10) # 预测测试集的标签
y_pred = np.round(y_pred) # 将分类概率值转换成0/1整数值
show_matrix(y_test, y_pred) #神经网络
```

输出如下：





有了这几个混淆矩阵之后，我们才能够真正看出每个模型的优劣。请你注意，我们第一眼要看的是右下角的“真正”值，也就是模型到底抓出来了多少“真的可能会流失”的付费会员。

结果显示，在 361 个流失会员中，逻辑回归模型抓出了 171 人，DNN 神经网络归一化之后的模型抓出了 199 人（这其实不错了），而未做归一化的 DNN 神经网络仅仅抓到了 50 人。哪个模型更靠谱？我想你心里已经有答案了。

到这里，你应该更加理解为什么整体准确率不足以反映出模型的真正分类情况。不过，你可能会问，混淆矩阵虽然直观，但它不是一个分数性的指标，如果我老板就是喜欢像“准确率”这样的分数型指标，怎么办？

很简单，我们可以在混淆矩阵的基础之上，引入“精确率”（也叫查准率）和“召回率”（也叫查全率）两个指标。

精确率和召回率

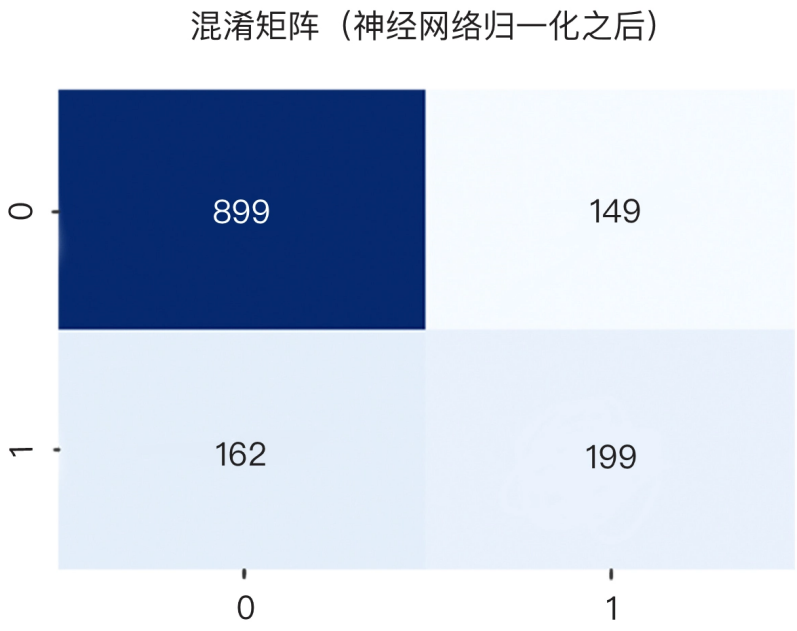
我们先说精确率。精确率也叫查准率，它的意义是：**在被分为正例的示例中，实际为正例的比例**。我们可以这样计算精确率：

$$\text{精确率（}Precision\text{）} = \frac{\text{被模型预测为正的正样本}}{(\text{被模型预测为正的正样本} + \text{被模型预测为正的}$$

其中，“被模型预测为正的正样本”就是混淆矩阵中的“真正”，也就是 TP；“被模型预测为正的负样本”则是混淆矩阵中的“假正”，也就是 FP 。所以，这个公式就是：

$$精确率（Precision）= \frac{TP}{(TP+FP)}$$

现在，我们拿刚才这个 DNN 神经网络归一化后的混淆矩阵为例：



就流失的用户而言：

真负 (TN)：被模型判断为留存的留存用户数：899;

假正 (FP)：被模型判断为流失的留存用户数：149;

假负 (FN)：被模型判断为留存的流失用户数： 162;

真正 (TP)：被模型判断为流失的流失用户数： 199.

所以，流失会员的**精确率为：**

$$流失会员的精确率（Precision）= \frac{199}{(199+149)} = 57\%$$

可以看到，虽然这个归一化后的 DNN 神经网络模型整体上的准确率为 78%，但是它基于流失用户的精确率只有 57%，说明它仍有提升的空间。

当然，我们也可以基于留存的用户来判断这个模型的精确率：

真负 (TN)：被模型判断为流失的流失用户数：199;

假正 (FP)：被模型判断为留存的流失用户数： 162;

假负 (FN)：被模型判断为流失的留存用户数： 149;

真正 (TP)：被模型判断为留存的留存用户数： 899.

这个模型基于留存用户的精确率为：

$$留存会员的精确率（Precision）= \frac{899}{(899+162)} = 85\%$$

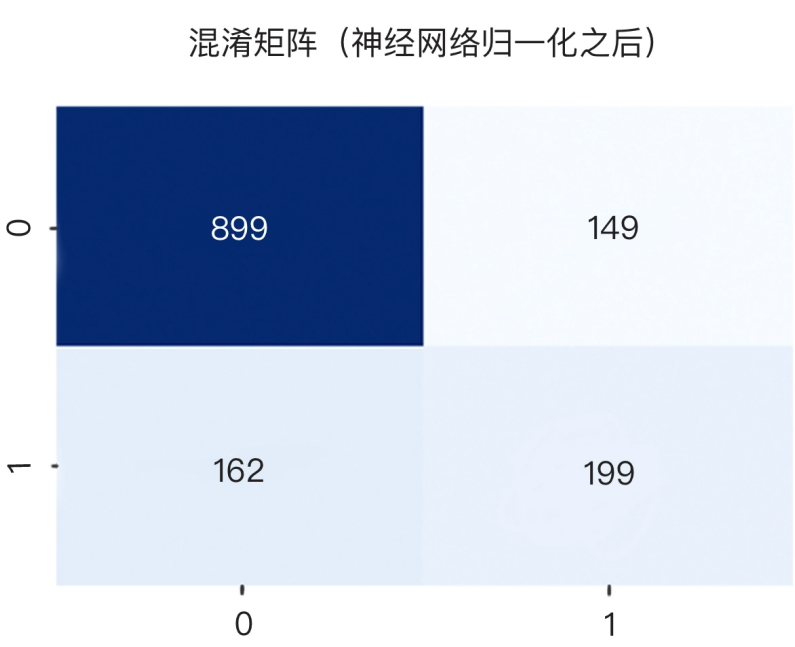
这是评判模型的另外一个视角。当然，从解决运营人员问题的角度出发，我们还是要基于流失用户来看模型的精确率，这样才能帮助运营人员进行有针对性的留客活动。

除了精确率，还有另一个标准是**召回率**，也叫**查全率**。你应该听说过“召回”这个词吧，就是劣质品蒙混过了质检这关，跑出厂了，被发现后得给召回来，销毁掉。召回率是覆盖面的度量，它度量的是被正确判为正例的正例比例，它和精确率是成对出现的概念，公式如下：

$$召回率（Recall）= \frac{TP}{(TP+FN)}$$

召回率考量了“假负（FN）”的存在，也就是需要考虑被误判为“合格品”的“劣质品”，在我们这个问题中的假负就是被误判为“留存”的“要流失”的会员。

对于刚才这个例子：



就流失会员而言，归一化后的 DNN 神经网络模型的**召回率为：**

$$召回率（Recall）= \frac{199}{(199+162)} = 55\%$$

我们看到，这个算法的召回率比精确率低一些。那么，我们应该以上面 57% 的精确率为准呢，还是应该以 55% 的召回率为准？答案是：当我们需要更多考量被模型预测为正的负样本时（本来是忠诚会员，误判为流失），我们看精确率；当我们需要更多考量被模型预测为负的正样本时（本来要流失了，误判为忠诚会员），我们看召回率。

对于我们这个问题，如果你问我，我会更关注召回率，因为我们就是害怕会员流失嘛。但是，如果精确率不够，运营人员会做很多无用功，把力气、时间和经费白白花在本来不会流失的人身上。

那有没有一个指标可以直接解决问题，不用这么绕来绕去？接下来，我就给你介绍一个单一指标，它可以基本搞定对不平衡数据集的分类评估。

F1 分数

这个指标就是 F1 分数。它结合了精确率和召回率的共同特点。F1 分数的公式如下：

精准率 召回率

$$F1 = 2 \times \frac{精准率 \times 召回率}{(精准率 + 召回率)}$$

这个指标可以同时体现“精确率”和“召回率”的评估效果，在数学上定义为“精确率和召回率的调和均值”。只有当召回率和精确率都很高时，分类模型才能得到较高的 F1 分数。

F1 指标特别适合于评估各类别样本分布不平衡的问题。因此，当你想用一个简单的方法来比较多种分类模型的优劣时，你选 F1 分数就对了。

下面，我们用代码求出上一讲中三个模型的 F1 分数。在 sklearn 中，F1 分数可以通过分类报告 classification_report 工具进行显示。此时，classification_report 也会把精确率、召回率和准确率一起显示出来，一举多得了。这三个指标的计算，也都会在 classification_report 内部完成，所以，我们只需要把预测值和真值传进这个函数就好了。

我们先定义一个显示分类报告的函数 show_report：

复制代码

```
from sklearn.metrics import classification_report # 导入分类报告
def show_report(X_test, y_test, y_pred): # 定义一个函数显示分类报告
    print(classification_report(y_test,y_pred,labels=[0, 1])) #打印分类报告
```

再调用这个函数打印出分类报告：

复制代码

```
show_report(X_test, y_test, y_pred)
```

下面，我们直接给出逻辑回归、归一化前后 DNN 神经网络模型的分类报告。

逻辑回归：

复制代码

```
              precision    recall  f1-score   support
           0       0.83      0.89      0.86      1048
           1       0.60      0.47      0.53       361
    accuracy                           0.78      1409
```

DNN 神经网络（归一化前）：

```
复制代码
1            precision    recall  f1-score   support
2         0       0.77      0.99      0.87      1048
3         1       0.81      0.14      0.24       361
4  accuracy                           0.77      1409
```

DNN 神经网络（归一化后）：

```
复制代码
1            precision    recall  f1-score   support
2         0       0.85      0.86      0.85      1048
3         1       0.57      0.55      0.56       361
4  accuracy                           0.78      1409
```

在这个 Report 中，我们更关注 1 值，也就是相对于流失客户的精确率、召回率和 F1 分数，尤其是 F1 分数。结果显示，虽然逻辑回归和归一化后的神经网络准确率都是 78%，但是，F1 分数最高的模型是归一化后的 DNN 神经网络。所以，对这个问题来说，归一化后的 DNN 神经网络性能最棒。

现在，有了 F1 分数这个比较优秀的分类评估指标，我们对模型的评估就靠谱得多了。不过，你可能会想：有没有什么图形化的显示方式，能更为直观地比较出多个模型的性能优劣呢？的确有。

ROC 曲线和 AUC

除了精确率、召回率、F1 分数之外，还有两个经常与二元分类器一起使用的工具：一个是“受试者工作特征曲线”（receiver operating characteristic curve，简称 ROC）；另一个是“曲线下面积”（Area under the Curve of ROC，简称 AUC）。

ROC 曲线绘制的是“真正类率”和“假正类率”的信息。其中，真正类率也叫真阳性率（TPR），表示在所有实际为阳性的样本中，被正确地判断为阳性的比率。它其实就是召回率的另一个名称。

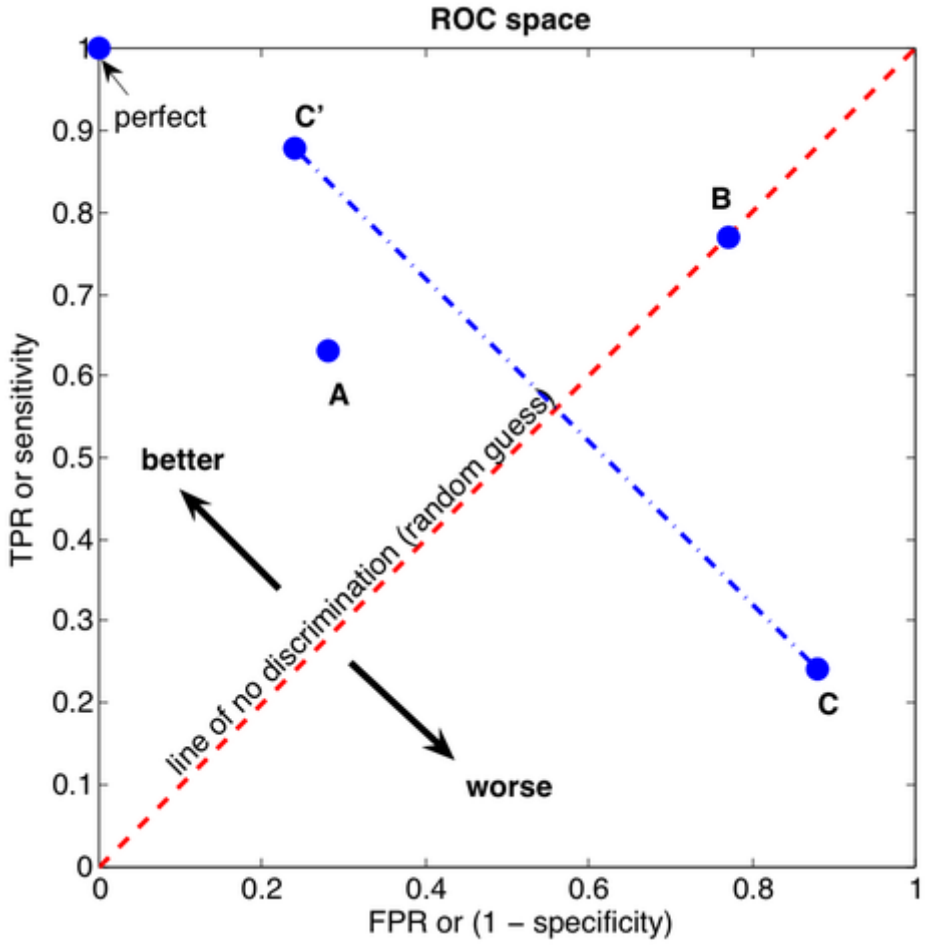
$$真阳性率（TPR）= \frac{TP}{(TP+FN)}$$

假正类率也叫伪阳性率（FPR），表示在所有实际为阴性的样本中，被错误地判断为阳性的比率：

$$伪阳性率（FPR）= \frac{FP}{(FP+TN)}$$

要绘制 ROC 曲线，我们需要先构建一个 ROC 空间。ROC 空间其实就是把伪阳性率（FPR）定义为 X 轴，真阳性率（TPR）定义为 Y 轴，所形成的坐标系空间。构建好 ROC 空间后，如果给定一个二元分类模型和它所预测的分类概率，我们就能根据样本的真实值和预测值，在 ROC 空间中画出一个个坐标点 (X=FPR, Y=TPR) 了。

那怎么判断这些坐标点的好坏呢？我们从坐标点 (0, 0) 到 (1,1) 画一个对角线，将 ROC 空间划分为左上 / 右下两个区域。在这条线以上的点代表了一个好的分类结果（真阳性率比伪阳性率高），而在这条线以下的点代表了差的分类结果（真阳性率比伪阳性率低）。由此，你可能也猜出了，在 ROC 空间里，越靠近左上的点越好，越靠近右下越劣，而对角线上的点，真阳性率和伪阳性率值相同，这就相当于随机猜测的结果。



如果我们将同一模型所有样本的 (FPR, TPR) 坐标都画在 ROC 空间里，连成一条线，就能得到该模型的 ROC 曲线。这条曲线与 ROC 空间右边缘线和下边缘线围成的面积，就是这个模型的曲线下面积（AUC）。

我们前面说，在 ROC 空间里，越靠近左上的点越好，越靠近右下越劣。因此，对于 AUC 来讲，AUC 越大，说明这个模型越趋向左上角越好。从具体的数值来看，AUC 的取值范围在 0.5 和 1 之间。 AUC 越接近 1.0，说明模型性能越高；等于 0.5 时，只相当于随机一猜，说明模型无应用价值。

如果你想要比较不同的分类模型，就可以在同一个 ROC 空间中，把每个模型的 ROC 曲线都画出来，通过比较 AUC 的大小，就能判断出各个模型的优劣。

下面，我们就比较一下逻辑回归和 DNN 神经网络（归一化之后）的 ROC 曲线和 AUC 值。因为没有归一化的 DNN 神经网络性能很差，所以，我们在这里就不把它放在一起比较了。

首先，我们导入 sklearn 中绘制 ROC 曲线和计算 AUC 的工具 roc_curve 和 auc：

复制代码

```
from sklearn.metrics import roc_curve #导入roc_curve工具
from sklearn.metrics import auc #导入auc工具
```

然后，我们在测试集上对 DNN 神经网络模型做一个预测，根据预测结果计算出 FPR,、TPR 和 AUC 的值。这里 dnn 代表神经网络。

复制代码

```
y_pred_dnn = dnn.predict(X_test).ravel() #神经网络预测概率值
fpr_dnn, tpr_dnn, thresholds_dnn = roc_curve(y_test, y_pred_dnn) #神经网络 TPR
auc_dnn = auc(fpr_dnn, tpr_dnn) #神经网络 AUC值
```

同样地，我们也计算出逻辑回归模型的 FPR、TPR 和 AUC 值，这里 lr 代表逻辑回归。

复制代码

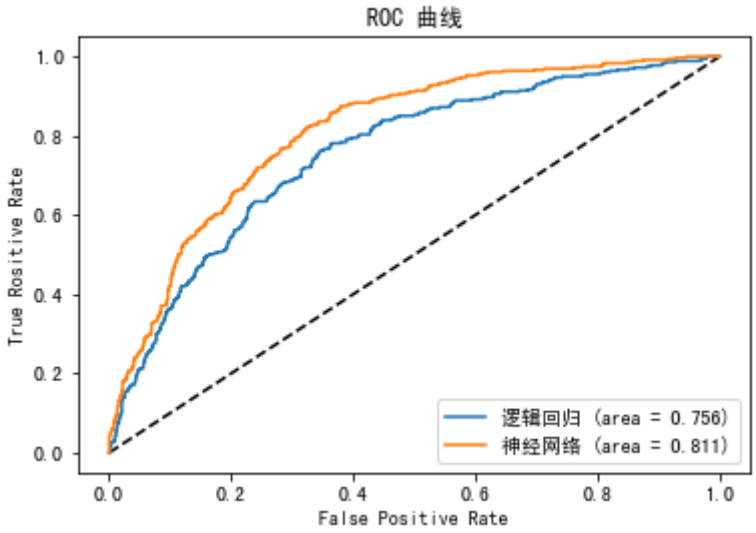
```
y_pred_lr = lr.predict_proba(X_test)[:, 1]  #逻辑回归预测概率值
fpr_lr, tpr_lr, thresholds_lr = roc_curve(y_test, y_pred_lr)  #逻辑回归 TPR FPR和
auc_lr = auc(fpr_lr, tpr_lr)  #逻辑回归 AUC值
```

最后，我们在一张图中显示这两个模型的 ROC 曲线和 AUC 值：

复制代码

```
plt.plot([0, 1], [0, 1], 'k--')  #设定对角线
plt.plot(fpr_dnn, tpr_dnn, label='神经网络 (area = {:.3f})'.format(auc_dnn))  #绘
plt.plot(fpr_lr, tpr_lr, label='逻辑回归 (area = {:.3f})'.format(auc_lr))  #绘制
plt.xlabel('False positive rate')  #X轴FPR
plt.ylabel('True positive rate')  #Y轴TPR
plt.title('ROC曲线')  #图题
plt.legend(loc='best')  #图例
plt.show()  #绘图
```

输出如下：



在这个曲线中，我们可以很明显地看出，DNN 神经网络的 ROC 曲线在整体上要高于逻辑回归模型（更逼近左上角），AUC 值（曲线下面积）是 0.811，比逻辑回归的 AUC 值 0.756 要高。这说明，DNN 神经网络模型的性能要好过逻辑回归。

总结一下

好，这一讲的内容就结束了。学完了这一讲，你需要铭记有一个重要的点，那就是**模型的好与不好，是基于用什么标准衡量**。对于正样本和负样本比例极度不平衡的样本集，我们需要选择正确的评估标准。

那么对于分类问题，尤其是各个类别的值很不平衡的数据集来说，哪些评估标准是更重要的呢？首先应该看混淆矩阵，混淆矩阵能够给出我们真正、假正、真负、假负的值，这个矩阵的信息量比准确率大很多。

通过混淆矩阵中的真正、假正、真负、假负的值，我们进而能求出精确率、召回率以及二者的综合指标 F1 分数。其中的 F1 指标，就是评估样本类别数量并不平衡的二分类问题的最简单方法。而要计算精确率、召回率以及 F1 分数，也很简单，我们用 sklearn 的 classification_report 就能轻松实现。

此外，我们还可以通过 ROC 曲线和 AUC 值，用图表的形式来直观地比较各个模型的分类性能优劣。请你注意，ROC 曲线越靠近左上角，模型越优，而 AUC 的值越接近 1，模型越优。

思考题

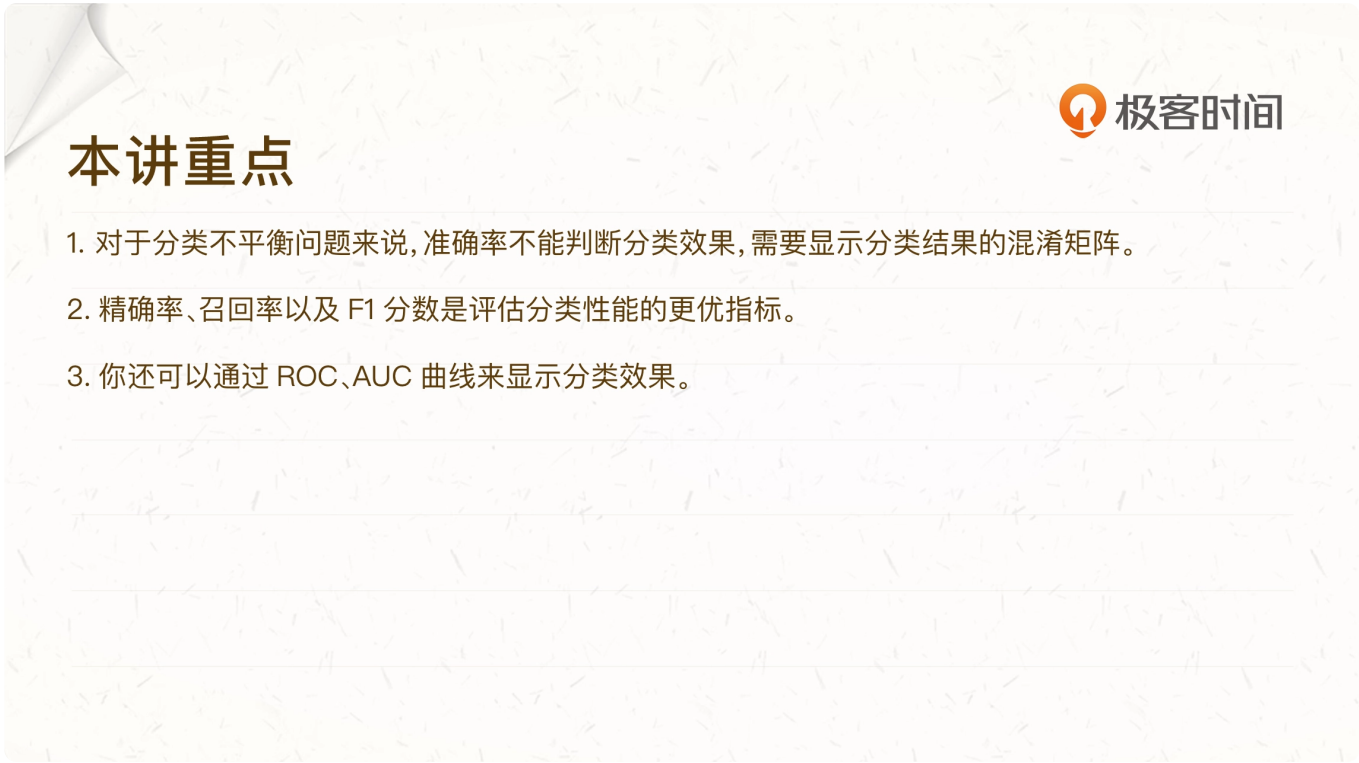
好，这节课就到这里了，最后，我给你留两道思考题：

1. 请你从多个维度思考，如何对神经网络模型进行优化，以实现更好的分类效果，得到更优的 F1 分数。

提示思路：改变训练的轮次、调整激活函数，优化器，神经网络结构。

2. 在第 10 讲中，我们介绍了怎么用 KFold 工具拆分数据集，做 K 折验证。其实，对于非平衡数据，我们也可以用 StratifiedKFold、StratifiedShuffleSplit 等拆分数据集，来做分层采样。所谓分层采样，就是在每一份子集中都保持和原始数据集相同的类别比例。若数据集有 2 个类别，比例是 8:2，则划分后的样本比例仍约是 8:2。请你尝试通过这个方式，对逻辑回归模型进行 K 折验证。此外，train_test_split 也有 stratify 参数，你也可以尝试用它来保持数据分割时的类别比例。

欢迎你在留言区和我分享你的观点，如果你认为这节课的内容有收获，也欢迎把它分享给你的朋友，我们下一讲再见！



分享给需要的人，Ta订阅后你可得 20 元现金奖励

生成海报并分享

赞 0 提建议

© 版权归极客邦科技所有，未经许可不得传播售卖。 页面已增加防盗追踪，如有侵权极客邦将依法追究其法律责任。

上一篇 15 | 二元分类：怎么预测用户是否流失？从逻辑回归到深度学习

下一篇 17 | 集成学习：机器学习模型如何“博采众长”?

精选留言 (1)

写留言

谦

2021-10-04

佳哥，对于不平衡数据集，训练的时候会不会容易造成模型更倾向于把比例较大的分类分对呢？因为训练的时候是降低整体损失，比例较大的分类对损失的贡献度应该更大，最后变成了模型更倾向于把比例较大的分对？

展开